

Diszlokációk mozgásának és átrendeződésének kollektív tulajdonságai

Sejtautomata modellekkel és kísérletekkel
vizsgálva

Dokori értekezés tézisei



Tüzes Dániel

Témavezetők: Groma István (DSc, egyetemi tanár)

Péter Dusán Ispánovity (PhD, adjunktus)

Konzulens: Michael Zaiser (DSc, egyetemi tanár)

Anyagtudomány és szilárdtestfizika (programvezető: Groma István)

Fizika Doktori Iskola

Természettudományi Kar

Eötvös Loránd Tudományegyetem

2018

A téma ismertetése

Az utóbbi néhány év kísérleti és számítógépes szimulációs vizsgálati eredményeképpen kiderült, hogy a szubmikron méretű kristályos rendszerek deformációs tulajdonságai alapvetően térnek el a tömbi anyagoknál megszokott viselkedéstől. Ebben a mérettartományban a deformációt diszlokációk kollektív mozgásával megvalósuló véletlen lavinák jellemzik[1]. Ezért a deformációs tulajdonságok leírására csak statisztikus módszerek használhatók. A doktori munka célja az egyelőre szinte teljesen ismeretlen statisztikus tulajdonságok kísérleti feltárása, valamint a jelenségek számítógépes szimulációval való jobb megismerése. Tekintve, hogy a nanotechnológia előretörésével az ipar mind gyakrabban használ olyan anyagokat, amelyek viselkedését alapvetően már e jelenségek dominálják, az elért eredmények közvetlen mérnöki alkalmazása is várható.

Előzmények és célkitűzés

Numerikus modellek

A munka első részeként célom a mikron méretű mintákban lejátszódó folyamatok statisztikus tulajdonságait (úgy mint feszültség-deformációs görbe, leggyengébb-láncszem modellel való összevetés, diszlokációmintázat-képződés) tanulmányozni új modellek segítségével.

A diszlokációlavínák tekintetében ismert, hogy azok nemcsak számításigényesebb diszkrét diszlokációdinamikai (DDD) szimulációkkal modellezhetőek [3], hanem magasabb skálájú, a diszlokációk kontinuum modelljére alapuló mezoszkopikus modellekkel is [4]. Egy ilyen modellben megjelenő szabad paramétereket eddig még nem kalibrálták alacsonyabb skálájú modellek alapján, pedig ezáltal egy effektív modell volna kapható, amely mutatja a hasonlóságot az alacsonyabb skálájú modellel az ahhoz illesztett paraméterekhez tartozó tulajdonságokban. Egy ilyen modell előnye a nagyobb hatékonysága, ami abban mutatkozik meg, hogy azonos számítógépes erőforrás és futtatási idő mellett nagyobb rendszerek is tanulmányozhatóak. Ehhez a fentiek értelmében az kell, hogy létezzenek olyan, a

makroszkopikus szerkezetben mérhető és definiálható mennyiségek, amelyek leírják az effektív modell skálája alatt, a mikroszerkezetben végbemenő folyamatokat. Egy ilyen modell különösképp előremutató, ha a hasonló viselkedés az illesztett tulajdonságokon túl másban is megmutatkozik, és ha a használhatósága túlmutat az eredeti modell alkalmazhatóságán.

1. Céлом, hogy egy új, a diszlokációk kontinuumelméletén alapuló mezoszkopikus modellt dolgozzak ki, amelynek a szabad paramétereit úgy választom meg, hogy az a legjobban közelítse a vizsgált tulajdonságokban az alacsonyabb skálájú DDD modellek eredményét.

Már a diszlokációk első megfigyelése óta tudható, hogy azok az anyagban nem homogén módon helyezkednek el, hanem mintázatokba rendeződnek. Ez a mikroszerkezet fontos következménnyel jár a makroszkopikus viselkedésben, ugyanis pl. ilyen diszlokációszerkezetek okozzák a ciklikus deformáció során megjelenő állandósult csúszási sávokat, ami az anyag kifáradásához és repedéséhez, végül töréséhez vezet. Ezek a szerkezetek abban is szerepet játszanak, hogy a különböző, mikron méretű mikrooszlopok – ún. mikropilárok – deformációs válaszai lényegesen eltérnek egymástól. Az ezen szerkezeteket leíró modellek többsége fenomenologikus megközelítésű, és míg egyesek olyan paramétereket tartalmaznak, amelyek mikroszkopikus eredete nem megmagyarázott, mások olyan viselkedéseket jósolnak, amelyeket kísérletileg nem figyeltek meg. Éppen ezért jelentett nagy előrelépést egy olyan elmélet, ami pusztán a DDD modellből kiindulva felépíti a diszlokációk kontinuumelméletét – amelynek minden paramétere a mikroszerkezet által meghatározott –, és lehetővé teszi a diszlokációmintázatok tanulmányozását [2]. A mintázatok kialakulásának lehetőségét a modellen elvégzett lineáris stabilitáselemzés mutatja, ami összekapcsolja a modell makroszkopikus paramétereit a mintázat tulajdonságaival, például a jellemző hullámhossz nagyságával [2]. Noha a kialakuló teljes mintázatról, annak robusztusságáról analitikusan kevés állítható, a matematikai modell numerikus implementációival ezek vizsgálhatóvá válnak.

2. Céлом, hogy egy új, a diszlokációk kontinuumelméletén alapuló mezoszkopikus modellt dolgozzak ki, amely számot ad a diszlokációmintázat-kialakulásról a lineáris stabilitáselemzés tartományán kívül, és lehetővé teszi a mintázatok robosztusságának vizsgálatát.

Kísérleti vizsgálatok

A diszlokációlavinákkal kapcsolatos kísérleti vizsgálatok eddig javarészt abból álltak, hogy néhány mikron átmérőjű mikrooszlopokat először elektronmikroszkópban előállították, majd onnan áthelyezve egy másik berendezésbe elvégezték a nanoindentációs kísérletet. Mivel a mikrooszlop FIB-bel történő kimunkálása és az összenyomás más berendezésben történt, ezért ez idáig nem volt lehetőség arra, hogy in situ módon kövessük a lavinák következtében kialakuló felületi lépcsők megjelenését. Egy olyan méretű nanoindenterrel azonban, amely mintával együtt elfér a pásztázó elektronmikroszkóp vákuumkamrájában, lehetőség nyílik in situ deformációs kísérletek elvégzésére.

A deformációs kísérletek során számos adat gyűjthető a bekövetkező szerkezetváltozásról az akusztikus jelek érzékelésével. Azonban a különféle végbemenő folyamatok és az azok keltette jelek összepárosítása nem egyértelmű feladat, mert a jelek javarésze – tömbi minta esetén – a minta belsejéből származik, és a változás csak mikroszkopikus skálán látható. Egy, a mikropillárhoz csatolt akusztikus emissziós detektorral azonban, ha az összenyomást in situ követjük, összetársíthatjuk a folyamatokat a detektált jellel, különös tekintettel a diszlokációlavinákra. Ezzel lehetőség nyílik teljesen új, az irodalomban eddig nem ismert mérések elvégzésére is.

3. Céлом egy olyan nanoindenter kifejlesztése, amivel megvalósítható egy olyan mérési összeállítás, amelyben mikropillárok deformációját pásztázó elektronmikroszkópban in situ módon követhetjük, miközben a mintához csatolt akusztikus detektorral a diszlokációlavinák keltette akusztikus jeleket detektáljuk.

Tekintettel arra, hogy a szimulációval vizsgálható rendszerek mérete ugyanabba a nagyságrendbe esik, mint a kísérletileg tanulmányoz-

ható mintaméret, a két módszerrel kapott eredmények közvetlenül összehasonlíthatók. Ez unikális lehetőséget teremt a szubmikronos plaszticitás tulajdonságainak jobb megértésére.

Alkalmazott módszerek

Numerikus modellek

Zaiser and Moretti [4] munkája nyomán egy sejtautomata (angolul cellular automaton, CA) modellt alkottam és programoztam meg. Ebben a modellben az anyag különálló részekből álló egységek (cellák) sokaságából áll, amik egymással csak az azok plasztikus deformációja során fellépő feszültségeken keresztül hatnak kölcsön. A CA modellben a cellaszintű folyáshatárt (τ_w -t) valószínűségi változóként kezelve azt úgy kalibráltam, hogy az első, legkisebb külső feszültség mellett megjelenő lavinánál a külső feszültség eloszlása ugyanaz a Weibull-eloszlás legyen, mint ami az alacsonyabb DDD szimulációkban látható. A τ_w várható értékét és a cellákban alkalmazott diszkrét deformációs lépés nagyságát úgy kalibráltam, hogy a feszültség-deformációs görbe két másik, különböző fajta DDD modellek görbéi közé essen. A τ_w valószínűségi változó mivolta miatt a rendszer deformációs válasza minden rendszerre más és más, és adott rendszerre is nemdeterminisztikus a fejlődése. A kívánt paraméterek összehasonlításához ezért nagymennyiségű szimulációs eredményt kell elemezni.

Egy ilyen CA modell alkalmas lehet olyan belső rendezetlenséggel rendelkező, alakítási lágyulást szenvedő anyagok törésének modellezésére is, ahol a törést a deformáció lokalizáció okozza. Ehhez bevezettem a modellben egy lágyulási mechanizmust. Az így kapott modellben a rendszer rendezetlenségét a τ_w eloszlása biztosítja. Ez a belső rendezetlenség nem szükségszerűen a diszlokációk rendezetlenségét mutatja, mi több, a vizsgált anyagnak még csak kristályosnak sem kell lennie. A vizsgált anyag lehet fémüveg, fémhab, vagy bármilyen, a fenti feltételeknek megfelelő anyag, amely egy magasabb skálán már homogén módon kezelhető.

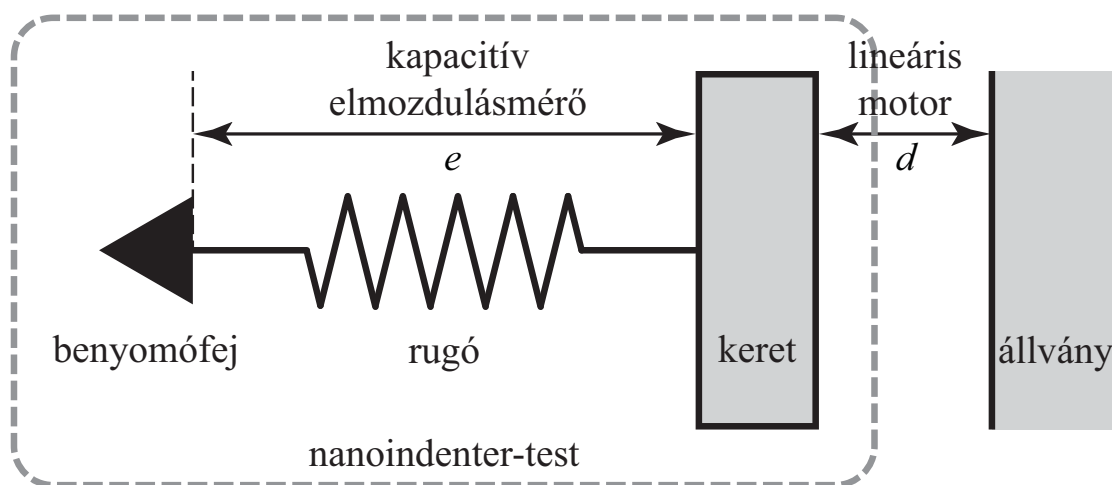
A diszlokációmintázatok tanulmányozására egy olyan CA modellt dolgoztam ki, amely a fenti modell mozgásegyenleteiben talál-

ható feszültségtagokon túl további olyanokat is tartalmaz, amelyeket a kontinuumelmélet lokálissűrűség-közelítése segítségével a diszlokációk korrelációjából eredeteztethetők. Egy ilyen modellben ugyan csak nagy szerepe van a véletlen folyamatoknak, amely jelentkezik egyrészt a különböző kezdeti folyáshatár-eloszlásban, másrészt nemdeterminisztikus időfejlődésben. Ezen sztochasztikus folyamatok eredményeként a fejlődő mintázatok részleteikben rendszerről rendszerre mások, azonban több szimulációs eredményt együttesen kiértékelve a közös tulajdonságaik megállapíthatók. A mintázat jellemző hullámhosszát az egyes rendszerek diszlokációsűrűségéből úgy határozhatjuk meg, hogy azokat Fourier-térben átlagoljuk. A rendszer robosztusságát a sztochasztikus folyamatok erősségének állításával és extrémális dinamika alkalmazásával vizsgálhatom. Utóbbi alatt azt értem, hogy feltételezem, hogy csak azon diszlokációk mozognak, amelyekre a legnagyobb erők hatnak.

Kísérlet

Kereskedelmi forgalomban kapható eszközök segítségével elmozdulást már szubnanométeres tartományban mérhetünk kapacitív szenzorok segítségével, valamint tárgyakat is mozgathatunk hasonló pontossággal speciális lineáris motorok segítségével. A minta feszültség-deformáció görbéjét megadhatjuk a benyomófej elmozdulása, illetve a benyomófejre ható erő segítségével. Ezen értékek kimérésének a biztosításához egy három részből álló nanoindenter-testet terveztem az 1. ábra szerint. A keret d elmozdulása egy lineáris motor segítségével előírható az állványhoz képest. A benyomófej kerethez képesti e elmozdulását pedig egy kapacitív szenzor méri. Ezen adatokból kiszámolható a minta alakváltozása, $\epsilon = d - e$, másrészt a rugó összenyomódása, ami szintén ϵ . Utóbbiból a nanoindenter benyomófejére ható erő – a rugóállandó ismeretében – kiszámolható.

Ehhez a nanoindenter-testet egytömb alumíniumból terveztem meg, amelyben a rugókat számos lamellából álló lap, mintegy egymás mögé hajtogatott laprugók biztosítják. A szikraforgácsolás kelően precíz és finom megmunkálásnak bizonyult, hogy egy ilyen törekeny elrendezést meg lehessen valósítani. Egy ilyen elrendezés képes a nyomás irányában μN pontossággal erőt mérni, de az erőmérés köz-



Ábra. 1: A nanoindenter-test vázlatos szerkezete. A rugók egyedi kialakítása lehetővé teszi, hogy a benyomófej csak az összenyomás tengelyében mozdul el. A kerethez képesti elmozdulását nagy pontosságú kapacitív elmozdulásmérővel mérjük. A keret az állványhoz képest egy lineáris motorral mozgatható nanométeres pontossággal.

ben a deformációs tengely irányától eltérő irányba nem mozdul el, máskülönben a d távolságot nem lehetne kellő pontossággal mérni.

A vákuumkamrában a rugó csillapodását nem biztosítja a levegő közegellenállása, ezért azt a rugó és benyomófej tartója alá helyezett állandó mágnessel örvényáramok keltésével lehet elérni.

Tézispontok

1. Megmutattam, hogy kristályos anyagok felbonthatóak olyan egységek rendszerére, amely egységek mérete a diszlokációk korrelációs hosszánál nagyobb, és az ilyen rendszerek vizsgálhatóak hatékonyan sejtautomaták segítségével. A kis deformációs tartományának vizsgálatával a modellt fel lehet úgy paraméterezni, hogy az hasonló viselkedést mutasson a diszkrét diszlokációdinamikai szimulációkkal. Ez a hasonlóság megmutatkozik az első lavínához tartozó külső feszültség eloszlásában, annak szórásában és a rendszermérettel való skálázódásában, továbbá a feszültség-deformációs görbe alakjában. Egy

ilyen rendszer skálázási tulajdonságait két független exponens határozza meg. Az egyik az első lavinához tartozó külső feszültség hatványszerű eloszlásának exponense, a másik pedig meghatározható az azonos deformációhoz tartozó külső feszültség szórásából. [S2]

2. Megmutattam, hogy olyan, belső rendezetlenséggel jellemzett, de nagyskálán homogén anyagok, amelyek alakítási lágyulást szenvednek, és törésük a deformáció lokalizációjára vezethető vissza, hatékonyan vizsgálhatóak sejtautomata modellekkel. Megmutattam, hogy a belső rendezetlenség növelése eredményeként, noha a képlékeny alakváltozás már kisebb feszültségeknél elkezdődik, a törésig alkalmazható maximális erő és az elérhető képlékeny alakváltozás nagysága jelentős mértékben megnő. [S3]
3. A diszlokációk kontinuum-elmélet leírásában elegendő a lokálistérsűrűség közelítésig felírni a mozgásegyenlet tagjait ahhoz, hogy az így kapott rendszerben mintázatképződést figyeljünk meg. Megmutattam, hogy a mozgásegyenleteket megoldhatjuk egy sejtautomata rendszerrel sztochasztikus tagok jelenléte mellett és a kifejlődött mintázatok összhangban vannak az eredeti mozgásegyenleteken alkalmazott lineáris stabilitáselemzési jós-lattal. [S4]
4. Új nanoindentációs eszközt terveztem meg és kiviteleztem, amelynek segítségével lehetővé vált pásztázó elektronmikroszkópban mikrométerű oszlopok deformációjának in situ vizsgálata, és a berendezéshez csatolható akusztikus emissziós detektor segítségével összepárosíthatóvá váltak a pásztázó elektronmikroszkópban megfigyelt folyamatok és a detektált akusztikus jelek. A nanoindenter rugójának újszerű kialakítása lehetővé teszi a benyomófej kerethez képesti elmozdulásának pontos mérését kapacitív távolságmérő segítségével, ezáltal meghatározhatóvá téve a benyomófejre ható erő is. [S1]

Kitekintések, további lehetőségek

- Lehetőség van a 2-es tézispontban említett modell paramétereit alacsonyabb skálás, molekuladinamikai szimulációk segítségével felparaméterezni, így a modell jóslatait konkrét anyagokra lehet vonatkoztatni.
- Az 1-es és 3-as pontban említett sejtautomata modellek egyesíthetőek, és a várakozás szerint egy ilyen modell egyesítené a két modell alkalmazhatósági területét.
- A 4-es pontban említett nanoindentációs eszköz célja, hogy nagymennyiségű adatot lehessen gyűjteni számos mikrooszlop összenyomásáról. Ez egy jelenleg is futó kutatás a kutatócsoportban. A legnagyobb mérési hibát, zajt vagy nehézséget okozó alkatrész további fejlesztésével a mérések még értékesebbé válhatnak. Lehetőség van például a rugók és a benyomófej közti rész tömegének jelentős csökkentésére, ami a mikrooszlopok deformációjának gyorsabb és pontosabb lekövetését tenné lehetővé.

Saját publikációim a témában

- [S1] Ádám István Hegyi, Péter Dusán Ispánovity, Michal Knapek, Dániel Tüzes, Kristián Máthis, František Chmelík, Zoltán Dankházi, Gábor Varga, and István Groma. “Micron-Scale Deformation: A Coupled In Situ Study of Strain Bursts and Acoustic Emission”. In: *Microscopy and Microanalysis* 23.6 (2017), pp. 1076–1081. DOI: [10.1017/S1431927617012594](https://doi.org/10.1017/S1431927617012594).
- [S2] Péter Dusán Ispánovity, Dániel Tüzes, Péter Szabó, Michael Zaiser, and István Groma. “Role of weakest links and system-size scaling in multiscale modeling of stochastic plasticity”. In: *Phys. Rev. B* 95 (5 Feb. 2017), p. 054108. DOI: [10.1103/PhysRevB.95.054108](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.054108).

- [S3] Dániel Tüzes, Péter Dusán Ispánovity, and Michael Zaiser. “Disorder is good for you: the influence of local disorder on strain localization and ductility of strain softening materials”. In: *International Journal of Fracture* 205.2 (June 2017), pp. 139–150. ISSN: 1573-2673. DOI: [10.1007/s10704-017-0187-1](https://doi.org/10.1007/s10704-017-0187-1).
- [S4] Ronghai Wu, Dániel Tüzes, Péter Dusán Ispánovity, István Groma, Thomas Hochrainer, and Michael Zaiser. “Instability of dislocation fluxes in a single slip: Deterministic and stochastic models of dislocation patterning”. In: *Phys. Rev. B* 98 (5 Aug. 2018), p. 054110. DOI: [10.1103/PhysRevB.98.054110](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.054110).

Irodalomjegyzék

- [1] Dennis M. Dimiduk, Chris Woodward, Richard LeSar, and Michael D. Uchic. “Scale-Free Intermittent Flow in Crystal Plasticity”. In: *Science* 312.5777 (2006), pp. 1188–1190. ISSN: 0036-8075. DOI: [10.1126/science.1123889](https://doi.org/10.1126/science.1123889).
- [2] István Groma, Michael Zaiser, and Péter Dusán Ispánovity. “Dislocation patterning in a two-dimensional continuum theory of dislocations”. In: *Phys. Rev. B* 93 (21 June 2016), p. 214110. DOI: [10.1103/PhysRevB.93.214110](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.214110).
- [3] Péter Dusán Ispánovity, Lasse Laurson, Michael Zaiser, István Groma, Stefano Zapperi, and Mikko J. Alava. “Avalanches in 2D Dislocation Systems: Plastic Yielding Is Not Depinning”. In: *Phys. Rev. Lett.* 112 (23 June 2014), p. 235501. DOI: [10.1103/PhysRevLett.112.235501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.235501).
- [4] Michael Zaiser and Paolo Moretti. “Fluctuation phenomena in crystal plasticity—a continuum model”. In: *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2005.08 (2005), P08004. DOI: [10.1088/1742-5468/2005/08/P08004](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2005/08/P08004).